Anderson Modelに於けるKondo effect

AUTHOR(S):

小口, 明秀

Anderson Modelに於けるKondo effect

東数大・理　小口明秀

（4月4日受理）

§1 序

S−D相互作用と Anderson model[1] との関係は，多くの人によって論じられている。例えば，Schriffer[2] は，Anderson model に正準変換を施し，effective な S−D Hamiltonian を導びいている。又最近 Rivier, Zuckermann[3] は， impurity site で反対向きの Spin を持った electron −hole の散乱によって生じる localized spin fluctuation を考え，その life time と Kondo 温度との関係を議論している。金属中の localized magnetic state を説明する H−F 近似では，温度を有限にしても，Kondo 温度に対応するものは出て来ない。correlation を考えた Schriffer, Mattis[4] や Hewson[5] 等の結果は，T＝0 で localized magnetic state そのものの出現さえ出にくくしている。correlation を考えると H−F 近似とは質的に異なった解が求まる可能性があり，Kondo 温度は，その1つである。つまり Anderson model で S−D 相互作用と同一の現象を取扱おうとすると，H−F 近似でなく，Green function も高次のものを考えねばならない。

我々は decoupling による ambiguity を除いた，K. Sawada[6] による新しい Green function の formalism をもちいて，近似 Eq(10)，(11) 内で Exact に Anderson model を解く。方法は，Zittartz，Müller − Hartmann[7] に従って，結果は $E+\frac{U}{2}=0$，$\langle N_{d\uparrow}\rangle=\langle N_{d\downarrow}\rangle=\frac{1}{2}$ の時，Kondo 温度として

$$T_k=\frac{2\alpha}{\pi}D\exp\left[-\frac{1}{U\gamma}\left(\frac{U^2}{4}-U\gamma\delta+\gamma^2(UA\pi^2-2\pi^2)\right)\right]$$

ここでDは conduction band の half width, U はクーロンエネルギー δ，A は定数，γ は N(0)を fermi level の state density とした時，$N(0)\langle V_{dk}^2\rangle_{av}$ である。

§2 Green function

Zubarev によって展開された2時間 Green 函数の方法は，t時間の operator の運動を追って，Green 函数の運動方程式を作っていく際，その式を close させる為に decoupling が必要となる。しかし，その方法が一意的でなく，近似もあまり明らかでなく，又 decoupling によって得られた答が定性的にも異る様な場合があり，欠点がある。K. Sawada によって考えられた Green function の formalism は deccupling を必要としない故に得られる結果が一意的で近似の意味もつけやすいという点が有利である。

例えば，Hamiltonian として，fermi 粒子系を考えて

$$H = \Sigma_k \epsilon_k C_k^+ C_k + \Sigma_{ij\ell m} V(ij\ell m)\, C_i^+ C_j^+ C_\ell C_m \quad \cdots\cdots\cdots (1)$$

をとる。t時間の Heisenberg operator は

$$C(t) = e^{iHt} C(0)\, e^{-iHt} = C(0) + it\,[H, C]_{t=0} + \frac{(it)^2}{2!}[H,[H,C]] + \cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots \quad (2)$$

で表わされる。第2項以下の commutator より，operator が，3個，5個より成る operator の組が出て来る。つまりt時間の1個の operator $C(t)$ は，0時間の $C(0)$，$C^+(0)\ C(0)\ C(0)$，$C^+(0)\ C^+(0)\ C(0)\ C(0)\ C(0)$ 等の operator との相互作用を経て，t時間後の状態になったわけである。以上を考えて，我々は，t時間の operator を0時間の operator で次の様に展開する。

$$\theta(t)\, C_i(t) = \Sigma_j G_{ij}(t)\, C_j + \Sigma_{j\ell m} K_{i,j\ell m}(t) \circ C_j^+ C_\ell C_m \circ + \cdots \quad \cdots\cdots\cdots (3)$$

ここで $\theta(t)$ は $t>0$ だけを考える為の step function である。$\circ\cdots\cdots\circ$ の notation は state の完全性を保つ為に $\circ\cdots\cdots\circ$ の中の任意の2つ以上の operator の組合せの平均値を0とすると云う意味を持つ。なお一つの operator の平均値が意味を持つ，例えば，boson の場合等は，一つでも $\circ a \circ$ のように $\circ\cdots\cdots\circ$ ではさまれた operator の平均値は0とする。この

展開にあらわれた各項の係数を Green function と呼ぶ事にする。(3) 式の両辺より，$C_n^+(0)$ との anti commutator を作り平均値を作れば

$$<\{\theta(t)\, C_i(t),\ C_n^+(0)\}> = \Sigma_j G_{ij} <\{C_j,\ C_n^+\}>$$

$$+ \sum_{j\ell m} K_{i,j\ell m} <\{\circ C_j^+ C_\ell C_m \circ,\ C_n^+\}> + \cdots\cdots \qquad (4)$$

$\circ \cdots\cdots \circ$ の definition より (4) 式の第2項以下は全て0になるから，結局

$$G_{i,j}(t) = <\{\theta(t)\ C_i(t),\ C_j^+(0)\}> \quad \cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots \qquad (5)$$

が得られる。同様にして，

$$K_{i,j\ell m} = <\{[\{\theta(t)\ C_i(t),\ C_m^+\},\ C_\ell^+],\ C_j\}> \quad \cdots\cdots \qquad (6)$$

ここで $[\cdots,]$ は commutator。以下同様にして展開の各係数としての Green function が求まる。展開の第一項の係数 G は普通の二時間 Green function と同じ表式を持つ故に Spectrum representation が出来て，fluctuation − dissipation 定理が成立する。第2項以下に現れる Green function は普通の2時間 Green function と異なっている。多体の correlation function は前と同様にして commutator を作る事によって求まる。

運動方程式は (3) より

$$i \frac{d}{dt} \theta(t)\ C_i(t) = i\delta(t)\ C_i(0) + \Sigma_j G_{ij}(t)\ [C_j,\ H]$$

$$+ \Sigma_{j\ell m} K_{i,j\ell m}(t)\ [\circ C_j^+ C_\ell C_m \circ,\ H] + \cdots\cdots \qquad (7)$$

(5) (6) 等より (7) と $C_j^+(0)$ 等の commutator を作り平均値をとる事によって，Green function の運動方程式が得られる。Hartree − Fock の近似は (3) の展開で，第一項のみをとる事に対応する。又 Super conductor での Gorkov の近似は (3) 式の展開を

$$\theta(t)\ C_{k\uparrow}(t) = \sum_{k'} G_{kk'} C_{k'\uparrow} + \Sigma\ F_{kk'} C_{k'\downarrow}^+ \quad \cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots (8)$$

とした事に対応している。

§3 運動方程式

Hamiltonian として，Anderson Model をとる。

$$H=\Sigma_{k,s}\varepsilon_k n_{ks}+E(n_{d\uparrow}+n_{d\downarrow})+Un_{d\uparrow}n_{d\downarrow}$$
$$+\sum_{k,s}V_{dk}(c^{+}_{ks}c_{ds}+c^{+}_{ds}c_{ks}) \quad \cdots\cdots\cdots \quad (9)$$

ここで簡単の為，V_{dk} は real とした。以下の議論は V_{dk} が complex でも変りない。ε_k，E は各々 Fermi lerel より測ったエネルギーである。§1でのべた様に，correlation の強い時，H−F 近似では，不満足で，近似をさらにあげる必要がある。§2でのべた formalism を用いて，Hamiltonian が rotation invariance をみたしている事を考慮して次の近似をする。

$$\theta(t)\,c_{ks}(t)=\Sigma_{k's'}G^{ss'}_{kk'}(t)\;c_{k's'}+\Sigma_{s'}G^{ss'}_{kd}c_{ds'}$$
$$+\Sigma_{s'}K^{ss'}_{kd}\circ c_{ds'}n_{d-s'}\circ+\Sigma_{\ell s'}L^{ss'}_{k,\ell d}\circ c_{\ell s'}n_{d-s'}\circ$$
$$+\Sigma_{\ell}F^{ss'}_{k,d\ell}\circ c_{ds'}c^{+}_{d-s'}c_{\ell-s'}\circ+\Sigma_{\ell}M^{ss'}_{k,\ell d}\circ c_{\ell s'}n_{ds'}\circ$$
$$+\Sigma_{\ell}N^{ss'}_{k,d\ell}\circ c_{\ell s'}c^{+}_{d-s'}c_{ds'}\circ \quad \cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots \quad (10)$$

$$\theta(t)\,c_{ds}(t)=\sum_{k's'}\mathcal{G}^{ss'}_{dk'}(t)\,c_{k's'}+\sum_{s'}\mathcal{G}^{ss'}_{dd}c_{ds'}$$
$$+\sum_{s'}\mathcal{K}^{ss'}_{dd}\circ c_{ds'}n_{d-s'}\circ+\Sigma\,\mathcal{L}_{d,\ell d}\circ c_{ds'}n_{d-s'}\circ$$
$$+\Sigma\,\mathcal{F}^{ss'}_{k,d\ell}\circ c_{ds'}c^{+}_{d-s'}c_{\ell-s'}\circ+\Sigma\,\mathcal{M}^{ss'}_{k,\ell d}\circ c_{\ell s'}n_{ds'}\circ$$
$$+\Sigma\,N^{ss'}_{k,d\ell}\circ c_{\ell s'}c^{+}_{d-s'}c_{ds'}\circ \quad \cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots \quad (11)$$

近似は展開を上記で切った事で，これによって，d−electron−hole や s−d electron 等の correlation は考えられている。

(10) より各々の Green function は

$$G^{ss'}_{kk'}=\langle\{\theta(t)\,c_{ks}(t),\,c^{+}_{k's'}\}\rangle,\quad G^{ss'}_{kd}=\langle\{\theta(t)\,c_{ks}(t),\,c^{+}_{ds'}\}\rangle$$

$$K^{ss'}_{k,d} = <\{[\{\theta(t)\ C_{ks}(t),\ C^{+}_{d-s'}\},\ C_{d-s'}],\ C^{+}_{ds'}\}>$$

$$L^{ss'}_{k,\ell d} = <\{[\{\theta(t)\ C_{ks}(t),\ C^{+}_{d-s'}\},\ C_{d-s'}],\ C^{+}_{\ell s'}\}>$$

$$F^{ss'}_{k,d\ell} = <\{[\{\theta(t)\ C_{ks}(t),\ C^{+}_{\ell-s'}\},\ C_{d-s'}],\ C^{+}_{ds'}\}>$$

$$M^{ss'}_{k,\ell d} = <\{[\{\theta(t)\ C_{ks}(t),\ C^{+}_{ds'}\},\ C_{ds'}]\ C^{+}_{\ell s'}\}>$$

$$N^{ss'}_{k,d\ell} = <\{[\{\theta(t)\ C_{ks}(t),\ C^{+}_{ds'}\},\ C_{d-s'}],\ C^{+}_{\ell s'}\}> \qquad (12)$$

同様にして（11）より $\mathscr{G}_{dk}$, $\mathscr{G}_{dd}$, $\mathscr{K}_{dd}$, $\mathscr{L}_{d,\ell d}$, $\mathscr{F}_{d,d\ell}$, $\mathscr{M}_{d,\ell d}$, $\mathscr{N}_{d,\ell d}$ は（12）の $\theta(t)\ C_{ks}(t)$ を $\theta(t)\ C_{ds}(t)$ にかえる事によって得られる。

Green function の運動方程式を作る際，Hamiltonian（9）は Spin conservation, number conservation をみたす為 ◦……◦ の notation に従ってあらわれる平均値 $<C^{+}_{k\uparrow}\ C_{d\downarrow}>$, $<C_{\ell\uparrow}\ C_{d\downarrow}>$ 等は 0 とする。

（10）より

$$i\frac{d}{dt}\theta(t)\,C_{ks}(t) = \sum_{k's'} G^{ss'}_{kk'}(\varepsilon_{k'} + V_{dk'}\,C_{ds'})$$
$$+ \sum_{s'} G^{ss'}_{kd}(E\,C_{ds'} + U C_{ds'}\,n_{d-s'} + \Sigma_\ell V_{d\ell}\,C_{\ell s'})$$
$$+ \sum_{s'} K^{ss'}_{kd}\{E\,C_{ds'}\circ n_{d-s'}\circ + U C_{ds'}\,n_{d-s'}(1-<n_{d-s'}>)$$
$$+ \Sigma_\ell V_{d\ell}(C_{\ell s'}\circ n_{d-s'}\circ - C^{+}_{\ell-s'}\,C_{d-s'}\,C_{ds'}$$
$$+ C_{ds'}\,C^{+}_{d-s'}\,C_{\ell-s'})\} + \sum_{\ell's'} L^{ss'}_{k,\ell d}\{(\varepsilon_\ell\,C_{\ell s'} + V_{d\ell}\,C_{ds'})$$
$$\circ n_{d-s'}\circ + \sum_{k'} V_{dk'}\,C_{\ell s'}(C^{+}_{d-s'}\,C_{k'-s'} - C^{+}_{k'-s'}\,C_{d-s'})\}$$
$$+ \sum_{k's'} F^{ss'}_{k,dk'}\{-E\,C_{ds'}<C^{+}_{d-s'}\,C_{k'-s'}>$$
$$- U C_{ds'}\,n_{d-s'}<C^{+}_{d-s'}\,C_{k'-s'}> + \Sigma_\ell V_{d\ell}(C_{\ell s'}\circ C^{+}_{d-s'}$$
$$C_{k'-s'}\circ - C_{ds'}\,C^{+}_{\ell-s'}\,C_{k'-s'}) + \varepsilon_{k'}\,C_{ds'}\,C^{+}_{d-s'}\,C_{k'-s'}$$
$$+ V_{dk'}\,C_{ds'}\,C^{+}_{d-s'}\,C_{d-s'}\} + \sum_{\ell s'} M^{ss'}_{k,\ell d}\{(\varepsilon_\ell\,C_{\ell s'} + V_{d\ell}C_{ds'})$$

$$\circ n_{ds'}{}^{\circ} + C_{\ell s'} \Sigma_{k'} V_{dk'} (C^{+}_{ds'} C_{k's'} - C^{+}_{k's'} C_{ds'})$$

$$- \langle C_{\ell s'} C^{+}_{ds'} \rangle (E\, C_{ds'} + U C_{ds'} n_{d-s'}) \}$$

$$+ \sum_{\ell s'} N^{ss'}_{k,d\ell} \{ \varepsilon_{\ell} C_{\ell s'} C^{+}_{d-s'} C_{ds'} - \Sigma_{k'} V_{dk'} C_{\ell s'}$$

$$(C^{+}_{k-s'} C_{ds'} - C^{+}_{d-s'} C_{k's'}) \} \quad \cdots\cdots \quad (13)$$

同様にして，$\theta(t)\ C_{ds}(t)$ は（13）の Green function を対応する Green function に書きかえる事によって，その運動方程式を得る。（12）の定義より (13) との commutator を作り，各々の Green function を求めると

$$M^{ss'}_{k,\ell d} = N^{ss'}_{k,d\ell} = \mathscr{M}^{ss'}_{d,\ell d} = \mathscr{N}^{ss'}_{d,\ell d} = 0 \quad \cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots \quad (14)$$

これは $\theta(t)$ の定義より $t<0$ で $\theta(t)\,C_{ds}(t)$, $\theta(t)\ C_{ks}(t)$ が 0 という条件より決まる。

$$F^{ss'}_{k,dk'} = L^{ss'}_{k,k'd} = \frac{V_{dk'}}{\omega-\varepsilon_{k'}} K^{ss'}_{kd}$$

$$\mathscr{F}^{ss'}_{d,dk'} = \mathscr{L}^{ss'}_{d,k'd} = \frac{V_{dk'}}{\omega-\varepsilon_{k'}} \mathscr{K}^{ss'}_{dd} \quad \cdots\cdots \quad (15)$$

$$K^{ss'}_{kd} = \frac{U}{M(\omega,s)} G^{ss'}_{kd}(\omega) \qquad \mathscr{K}^{ss'}_{dd}(\omega) = \frac{U}{M(\omega,s)} \mathscr{G}^{ss'}_{dd}(\omega) \quad \cdots\cdots \quad (16)$$

$$\mathscr{G}^{ss'}_{dd} = \frac{i\,\delta_{ss'}}{2\pi} t^{s''}(\omega) \qquad \mathscr{G}^{ss'}_{dk} = G^{ss'}_{kd} = \frac{V_{dk}}{\omega-\varepsilon_{k}} \mathscr{G}^{ss'}_{dd} \cdots\cdots\cdots \quad (17)$$

$$G^{ss'}_{kk'} = \frac{i}{2\pi} \delta_{kk'} \delta_{ss'} \frac{1}{\omega-\varepsilon_k} + \frac{V_{dk}}{(\omega-\varepsilon_k)} \mathscr{G}^{ss'}_{dd} \frac{V_{dk'}}{(\omega-\varepsilon_{k'})} \cdots \quad (18)$$

ここで

$$M(\omega, s) = \omega - E - U(1-n_{d-s}) - 2F(\omega) + U L(\omega) \quad \cdots (19)$$

$$(t^{s}(z))^{-1} = z - E - U n_{d-s} - F(z) - \frac{U}{M(zs)} [U n_{d-s}(1-n_{d-s})$$

$$+ n_{d-s} F(z) - K(z,s) + (z-E-Un_{d-s}) L(z,s) - a(s)] \cdots (20)$$

$$K(z,s)=\Sigma_{k,\ell}\frac{V_{dk}V_{d\ell}}{z-\varepsilon_k}\langle C^+_{\ell-s}C_{k-s}\rangle$$

$$=\sum_k f(\varepsilon_k)\frac{V_{dk}^2}{z-\varepsilon_k}+\int f(\omega)\mathscr{T}_\omega\frac{F(\omega)\mathscr{G}^{-s-s}_{dd}(\omega)}{z-\omega}(F(\omega)-F(z))d\omega \qquad \cdots\cdots\cdots\cdots (21)$$

$$L(z,s)=\Sigma_k\frac{V_{dk}}{z-\varepsilon_k}\langle C^+_{d-s}C_{k-s}\rangle$$

$$=\int f(\omega)\mathscr{T}_\omega\frac{1}{z-\omega}(F(\omega)-F(z))\mathscr{G}^{-s-s}_{dd}(\omega)d\omega \qquad \cdots\cdots\cdots\cdots (22)$$

$$a(s)=\Sigma_k V_{dk}\langle C^+_{d-s}C_{k-s}\rangle=\int f(\omega)\mathscr{T}_\omega F(\omega)\mathscr{G}^{-s-s}_{dd}(\omega)d\omega \qquad \cdots\cdots\cdots\cdots (23)$$

$$F(z)=\Sigma_k\frac{V_{dk}{}^2}{z-\varepsilon_k} \qquad \cdots\cdots\cdots\cdots (24)$$

$$f(\omega)=\frac{1}{e^{\beta\omega}+1} \qquad \cdots\cdots\cdots\cdots (25)$$

又

$$\mathscr{T}_\omega G(\omega)=G(\omega+i\varepsilon)-G(\omega-i\varepsilon) \qquad \cdots\cdots\cdots\cdots (26)$$

を意味する。上記の Green function を求める際，$\langle C^+_{d-s}C_{k-s}\rangle$ は real とした。

(14) 式は一見 (10), (11) の近似内で rotation invariance を破るかのように見えるが，(15) 式より F＝L $\mathscr{T}=\mathscr{L}$ である事により，(10), (11) 式で最後の 2 項がなくとも rotation invariance になっている。

(20) は t－matrix の積分方程式になっている為，我々は，Zittartz, Müller－Hartmann（以下 Z－M と記す）に従ってとく。簡単の為，H－F で最も magnetic になりやすい条件 $E+\frac{U}{2}=0$ をとる。又 t－matrix は spin に対して対称であるから，常に $\langle n_{d\uparrow}\rangle=\langle n_{d\downarrow}\rangle$ の解がある事に注目して，特に $\langle n_{d\uparrow}\rangle=\langle n_{d\downarrow}\rangle=\frac{1}{2}$ の時を考える。この状態が Free－energy が minimum であるかは明らかでない。

(24)より

$$F(z)=\Sigma_k \frac{V_{dk}^{2}}{z-\epsilon_k}=\gamma\int\frac{\rho(\omega)}{z-\omega}d\omega \quad \cdots\cdots\cdots\cdots \quad (27)$$

とおく。

ここで $\gamma = N(0) < V_{dk}^{2} >_{av}$, N(0)は Fermi surface の state density.

zを複素数に拡張して，上半面，下半面で各々 analytic な函数を各々 F_r, F_a とする。

$$F(z)=\begin{cases} F_r(z) & Im z > 0 \\ F_a(z) & Im z < 0 \end{cases} \quad \cdots\cdots\cdots\cdots \quad (28)$$

なお $F_r(z)$ を上半面より，$F_a(z)$ を下半面より各々解析接続した函数も $F_r(z)$，$F_a(z)$ と呼ぶ事にする。

(21)に於て $f(\omega)=\frac{1}{2}\left(1-\mathrm{th}\frac{\beta\omega}{2}\right)$ を代入して(25)(28)を使うと

$$\begin{aligned} K(z) = & \frac{1}{2}F(z)-\frac{\gamma}{2}\int\frac{\mathrm{th}\frac{\beta\omega}{2}}{z-\omega}\rho(\omega)d\omega + \\ & \frac{1}{4\pi}\int\mathscr{T}_\omega\frac{1}{z-\omega}(F(\omega)-F(z))F(\omega)t(\omega)d\omega \\ & + \frac{1}{4\pi i}\int\frac{\mathrm{th}\frac{\beta\omega}{2}}{z-\omega}\{(F_r(\omega)-F(z))F_r(\omega)t_r(\omega) \\ & -(F_a(\omega)-F(z))F_a(\omega)t_a(\omega)\}d\omega \end{aligned} \quad \cdots\cdots \quad (29)$$

ここで，第3項は fluctuation − dissipation より 0，同様にして

$$\begin{aligned} L(z) = & \frac{1}{4\pi i}\int\frac{\mathrm{th}\frac{\beta\omega}{2}}{z-\omega}\left[(F_r(\omega)-F(z))t_r(\omega)\right. \\ & \left.-(F_a(\omega)-F(z))t_a(\omega)\right]d\omega \end{aligned} \quad \cdots\cdots\cdots\cdots \quad (30)$$

(29)，(30)を(20)に代入すると

$$t(z)=\frac{z-2F+UL}{z^2-3Fz+2F^2-C-UR+U\varphi} \quad \cdots\cdots\cdots\cdots \quad (31)$$

ここで

$$C = \frac{U^2}{4} - aU \qquad R(z) = \frac{\gamma}{2}\int \frac{\mathrm{th}\frac{\beta\omega}{2}}{z-\omega}\rho(\omega)\,d\omega \qquad \cdots\cdots\cdots \quad (32)$$

$$\varphi(z) = \frac{1}{4\pi i}\int \frac{\mathrm{th}\frac{\beta\omega}{2}}{z-\omega}\{(F_r(\omega)-F(z))^2 t_r(\omega) - (F_a(\omega)-F(z))^2 t_a(\omega)\}\,d\omega \qquad \cdots\cdots\cdots \quad (33)$$

(31) より F(z) を F_r, F_a におきかえた t−matrix を t_r, t_a と定義する。t_r, t_a は各々上半面，下半面で analytic で，F と同様に各々上半面，下半面より解析接続をする。

S−matrix は

$$1 + [F_r(z) - F_a(z)]\, t_r(z) = \frac{X^+(z)}{\phi_r(z)} \qquad \cdots\cdots\cdots\cdots \quad (34)$$

$$1 + [F_a(z) - F_r(z)]\, t_a(z) = \frac{X^-(z)}{\phi_a(z)} \qquad \cdots\cdots\cdots\cdots \quad (35)$$

ここで

$$\phi_{r,a} = z^2 - 3zF_{r,a} + 2F_{r,a}^2 - C - UR + U\varphi_{r,a} \qquad \cdots\cdots\cdots \quad (36)$$

$$X^{\pm} = z^2 - z(F_a+F_r) - zF^{\pm} + 2F_rF_a - C - UR^{\pm} + U\chi \qquad \cdots\cdots \quad (37)$$

$$\chi(z) = \frac{1}{4\pi i}\int \frac{\mathrm{th}\frac{\beta\omega}{2}}{z-\omega}\{F_r(\omega)-F_a(z))(F_r(\omega)-F_r(z))t_r - (F_a(\omega)-F_a(z))(F_a(\omega)-F_r(z))t_a\}\,d\omega \cdots\cdots\cdots \quad (38)$$

$\chi(z)$ は nonsingular function. (33) より $\varphi_{r,a}$ は $\mathrm{Im}z \gtrless 0$ で各々 φ^+, φ^- が定義出来る。又 R も同様にして R^+, R^- が定義出来る。φ_r^+, R^+ は上半面，φ_a^-, R^- は下半面で analytic. (37) の $F^{\pm}$ は $F_{r,a}$ と同じである。

(37) より

$$X^+ - X^- = -z(F_r - F_a) - U(R^+ - R^-) = (2z + U\mathrm{th}\frac{\beta z}{2})\, i\pi\rho(z) \quad \cdots \quad (39)$$

(33), (36) より

$$\phi_{r,a}^{+}-\phi_{r,a}^{-}=-U(R^{+}-R^{-})+U(\varphi_{r,a}^{+}-\varphi_{r,a}^{-})$$

$$=i\pi\gamma\rho(z)\ U\,\mathrm{th}\frac{\beta z}{2}\left[1+(F_{a,r}-F_{r,a})\ t_{a,r}\right] \quad \cdots \quad (40)$$

(34), (35), (36) を代入して

$$(\phi_r^{+}-\phi_r^{-})=C(z)\frac{X^{-}}{\phi_a^{-}} \quad \cdots\cdots\cdots\cdots\cdots \quad (41)$$

$$(\phi_a^{+}-\phi_a^{-})=C(z)\frac{X^{-}}{\phi_r^{+}} \quad \cdots\cdots\cdots\cdots\cdots \quad (42)$$

ここで

$$C(z)=\frac{U\,\mathrm{th}\frac{\rho z}{2}}{2z+U\,\mathrm{th}\frac{\beta z}{2}} \quad \cdots\cdots\cdots\cdots\cdots \quad (43)$$

(41), (42) より

$$\Xi(z)=\phi_a^{+}\phi_r^{+}-C(z)(X^{+})^2-\Omega(z)=\phi_a^{-}\phi_r^{-}-C(z)(X^{-})^2-\Omega(z)$$
$$\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots \quad (44)$$

ここで

$$\Omega(z)=\frac{2z}{2z+U\,\mathrm{th}\frac{\beta z}{2}}\left(z^2-3\gamma\int\rho(\omega)\,d\omega-C\right)^2$$

$\Xi(z)$ は全平面で analytic 又 $z\to\infty$ で $\Xi(z)\to 0$ より一致の定理から

$$\Xi(z)\equiv 0 \quad \cdots\cdots\cdots\cdots\cdots \quad (45)$$

よって

$$\phi_a^{+}\phi_r^{+}-C(z)(X^{+})^2=\Omega(z) \quad \cdots\cdots\cdots\cdots\cdots \quad (46)$$

(41) (42) (46) より

$$\phi_r^+ \phi_a^- = C(z)\, X^+ X^+ + \Omega(z) \equiv \kappa(z) \quad \cdots\cdots\cdots\cdots \quad (47)$$

(47) の solution は

$$\phi_r^+(z) = e^{-Q^+(z)} \qquad \phi_a^-(z) = e^{Q^-(z)} \quad \cdots\cdots\cdots\cdots \quad (48)$$

ここに

$$Q(z) = \frac{1}{2\pi i} \int \frac{d\omega}{z-\omega}\, \ell n\, \kappa(\omega) \quad \cdots\cdots\cdots\cdots \quad (49)$$

よって

$$1 - 2\pi i\, \gamma \rho(z)\ t_r(z) = X^+\, e^{Q^+(z)} \quad \cdots\cdots\cdots\cdots \quad (50)$$

$$1 + 2\pi i\, \gamma \rho(z)\ t_a(z) = X^-\, e^{Q^-(z)} \quad \cdots\cdots\cdots\cdots \quad (51)$$

(50), (51) は nonsingular function χ を通して t が入ってくる故 singular integral は含まない。しかし実際, (50), (51) を解く事は, めんどうであるが, (z−M) に従って t−matrix の Kondo Type anomalies を見出す事は容易である。

§ 4　Kondo 温度

ρ として Lorentian をとると

$$\rho(z) = \frac{D^2}{z^2 + D^2} \quad \cdots\cdots\cdots\cdots \quad (52)$$

ここで D は conduction band の half width.

(27) より

$$F_{r,a}(z) = \frac{\pi \gamma D}{z \pm i D} \quad \cdots\cdots\cdots\cdots \quad (53)$$

$\rho(\omega) = \rho(-\omega)$ より

$$F_r(\omega) = -\, F_a(-\omega) \quad \cdots\cdots\cdots\cdots \quad (54)$$

$$R^*(z) = R(-z) \quad \cdots\cdots\cdots\cdots \quad (55)$$

(54)(55)を(31)に代入すると

$$t_r(\omega) = -t_a(-\omega) \qquad \cdots\cdots\cdots\cdots\cdots \quad (56)$$

(38)より

$$\chi(z) = -A(\pi\gamma)^2\rho(z) \qquad \cdots\cdots\cdots\cdots\cdots \quad (57)$$

ここで

$$A = -\frac{1}{2\pi i}\int d\omega\, \mathrm{th}\,\frac{\beta\omega}{2}\,\frac{\omega-2iD}{(\omega-iD)^2}\,t_a(\omega) \qquad \cdots\cdots\cdots\cdots\cdots \quad (58)$$

又

$$F_rF_a = (\pi\gamma)^2\rho(z) \qquad \cdots\cdots\cdots\cdots\cdots \quad (59)$$

$$R^{\pm}(z) = \frac{\gamma}{2}\int\frac{\mathrm{th}\frac{\beta\omega}{2}}{z\mp\omega}\rho(\omega)\,d\omega = -\gamma\rho(z)\left[\psi\left(\frac{1}{2}+\frac{\beta D}{2\pi}\right)-\psi\left(\frac{1}{2}\mp\frac{i\beta D}{2\pi}\right)\right]$$

$$\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots \quad (60)$$

(23)より

$$a = \frac{1}{4\pi i}\int \mathrm{th}\frac{\beta\omega}{2}\left(F_r(\omega)\,t_r(\omega) - F_a(\omega)\,t_a(\omega)\right)d\omega$$

$$= -\frac{\gamma\pi D}{2\pi i}\int \mathrm{th}\frac{\beta\omega}{2}\,\frac{t_a(\omega)}{\omega-iD}\,d\omega \equiv \gamma\delta \qquad \cdots\cdots\cdots\cdots\cdots \quad (61)$$

Kondo 温度は Bound state の出来る温度であるから, Bound state では S-matrix は 0 。 よって

$$X^{\pm}(0) = 0 \qquad \cdots\cdots\cdots\cdots\cdots \quad (62)$$

によって T_k が求まる。

(57)〜(61)を(62)に代入して

$$T_k/_D = \frac{2\alpha}{\pi}\exp\left[-\frac{1}{U\gamma}\left(\frac{U^2}{4}-U\gamma\delta+\gamma^2(UA\pi^2-2\pi^2)\right)\right] \cdots (63)$$

ここで $\ell n\,\alpha = 0.577$ は Euler 定数。

§5 結　論

我々は，correlation を正しく扱う為，高次の Green function を使ってKondo温度を得た。$\gamma>0$ である事に注意すると(63)は(z−M)の結果と consistent である。又 Schriffer, Wolf[8] によって Anderson Model より導びかれた effective な S−D 相互作用を与える，exchange integral J は

$$J=-|V_{k_Fd}|^2\frac{U}{|E|(E+U)}<0 \qquad \cdots\cdots\cdots\cdots\cdots \quad (64)$$

で与えられる。(63)式は $E+\frac{U}{2}=0$ の場合である事を考えると

$$|V_{k_Fd}|^2=-\frac{JU}{4} \qquad \cdots\cdots\cdots\cdots\cdots \quad (65)$$

$\gamma=N(0)<V_{kd}^2>_{av}\sim N(0)|V_{k_Fd}|^2\sim-\frac{JU}{4}N(0)$. (65)を(63)に代入して γ は小さいとして1次以上を無視すると

$$T_K/D=\frac{2\beta}{\pi}e^{-\frac{1}{N|J|}} \qquad \cdots\cdots\cdots\cdots\cdots \quad (66)$$

となり，S−Dで求められているKondo温度と一致する。なお Anderson の意味での non magnetic と magnetic と Kondo温度との関係が多くの人によって議論されているが，それには(20)式を一般の場合について解かねばならない。がそれは数学的にかなり困難である。又実験と比較する為の比熱や resistivity 等は，次の論文で計算する。

終りに新しい Green function formalism と問題への suggest をして下さった K. Sawada 先生，有益な議論をして下さった T. Soda 先生，T. Kusakabe さん，H. Mamada さんに感謝します。

文　献

(1) P. W. Anderson Phy. Rev. 124 41 (1961)

(2) J. R. Schriffer J. Appl Phys. 38 1143 (1967)

(3) N. Rivier and M. J. Zuckermann Phy. Rev. Letters 21 904 (1968)

(4) J. R. Schriffer and D. C Mattis Phy. Rev. 140 A1412 (1965)

(5) A. C. Hewson Phy. Rev. 144 420 (1966)

(6) K. Sawada private communication

(7) J. Zittartz and E. Müller-Hartmann Z. Physik 212 380 (1968)

(8) J. R. Schriffer and P. A. Wolff Phy. Rev. 149 491 (1966)